

Particule quantique dans un potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux.

Objectifs

-
- ▷ Comprendre la quantification de l'énergie dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie.
 - ▷ Comprendre la quantification de l'énergie des états liés dans un puits de profondeur finie.
 - ▷ Comprendre l'élargissement effectif du puits par les ondes évanescentes.
 - ▷ Notions sur l'effet tunnel.
 - ▷ Coefficient de transmission associé à une particule libre incidente sur une barrière de potentiel.
 - ▷ Diagrammes d'énergie dans un double puits symétrique; les deux premiers états stationnaires (symétriques et antisymétriques); évolution temporelle d'une superposition de ces deux états.
-

1 Les états liés d'un puits de potentiel.

1.1 Position du problème.

On cherche dans ce chapitre à analyser les solutions de l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-iEt/\hbar)$ d'une particule dans un potentiel $V(x)$ constant par morceaux (potentiel rectangulaire), avec $\varphi(x)$ régie par l'équation différentielle

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + [E - V(x)]\varphi(x) = 0 \quad \text{où} \quad E \text{ désigne l'énergie totale de la particule.} \quad (1.1)$$

Les solutions sont, par morceaux, des exponentielles ou des sinusoides suivant le signe de $E - V$ (E est un nombre que nous cherchons à déterminer).

1. Si $V = V_0$ avec $E - V_0 > 0$, les fonctions d'onde ont un **comportement sinusoïdal**, $\varphi(x) \propto \exp(\pm ikx)$, avec $k = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$
2. Si $E - V_0 < 0$, les fonctions d'onde ont un **comportement exponentiel**, $\varphi(x) \propto \exp(\pm Kx)$, avec $K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

Pour obtenir les états liés de tels systèmes, on exige, comme dans le cas général, que les **solutions soient de carré sommable**.

On exige de plus que **les fonctions d'onde soient continues et à dérivée première continue aux points de discontinuité du potentiel** (c'est une conséquence de l'équation de SCHRÖDINGER, voir le § suivant).

Cette procédure permet de déterminer l'ensemble des valeurs admissibles de l'énergie E .

Dans les technologies modernes de microélectronique, ce type de potentiel très simple trouve quantité d'applications. La figure 1.1 ci-dessous montre un sandwich de $AlGaAs - GaAs - AlGaAs$: le relief correspond à la variation du potentiel "vu" par un électron de conduction. La partie centrale a une largeur de 6 nm . Sur l'axe vertical est portée la concentration en Al . La photo ci-dessous a été obtenue grâce au microscope à effet tunnel (voir § 3 de ce chapitre).

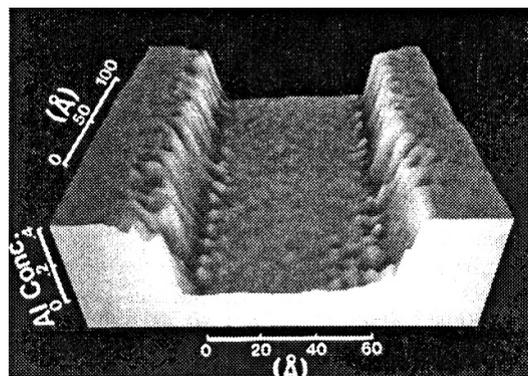


Figure 1.1: sandwich $AlGaAs - GaAs - AlGaAs$

1.2 Étude des discontinuités du potentiel.

Supposons qu'en un point x_0 , $V(x)$ présente une discontinuité finie : $\forall \varepsilon > 0, V(x_0 - \varepsilon) \neq V(x_0 + \varepsilon)$.

Une telle discontinuité ne correspond pas à une réalité physique mais représente assez bien une forte variation de potentiel sur une très petite distance. De nombreux problèmes mettant en jeu de telles discontinuités conduisent à des solutions exactes, ce qui justifie leur étude.

La fonction d'onde est finie en x_0 . intégrons l'équation 1.1 entre $x_0 - \varepsilon$ et $x_0 + \varepsilon$. On obtient

$$\varphi'(x_0 + \varepsilon) - \varphi'(x_0 - \varepsilon) + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (E - V)\varphi dx = 0$$

Cette équation montre que $\varphi'(x_0 + \varepsilon) - \varphi'(x_0 - \varepsilon)$ tend vers 0 avec ε : donc

φ' est continue en x_0 et *a fortiori* φ est continue sur une discontinuité finie du potentiel.

Cas d'une paroi parfaitement réfléchissante.

Supposons que $V(x) \rightarrow +\infty$ pour $x > x_0$.

On peut traiter ce problème comme cas limite du précédent en supposant que $V(x) = V_0 \rightarrow \infty$ pour $x > x_0$. Dans cette région, la solution acceptable de l'équation de SCHRÖDINGER est $\varphi(x) = Cte \exp(-Kx)$, avec

$$K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

On en déduit que $\varphi'(x_0)/\varphi(x_0) = -K$: ce rapport tend vers $-\infty$ quand $V_0 \rightarrow \infty$. Il n'y a aucune raison pour que $\varphi'(x_0)$ soit infini puisqu'il y a continuité de φ' en x_0 et que pour $x < x_0$, φ' est fini.

Donc $\varphi(x_0) = 0$: la fonction d'onde s'annule sur une paroi parfaitement réfléchissante (discontinuité infinie du potentiel).

1.3 Puits rectangulaire de profondeur infinie.

1.3.1 Position du problème.

Soit une particule libre de se déplacer entre les deux plans d'équations $x = 0$ et $x = a$, mais confinée entre ces deux plans, de telle sorte que sa fonction d'onde est nulle en dehors de $[0; a]$.

En mécanique classique, on décrit cette situation par un puits de potentiel infini, dans lequel on prend l'origine

$$\text{des énergies au fond du puits : on aura donc } V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } 0 < x < a \\ +\infty & \text{si } x > a \end{cases}$$

Les conditions aux limites de ce problème sont

$$\varphi(x=0) = 0 \quad \text{et} \quad \varphi(x=a) = 0$$

1.3.2 Solutions stationnaires de l'équation de SCHRÖDINGER.

Pour $0 < x < a$, φ est solution de l'équation différentielle $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + E\varphi(x) = 0$.

■ Pour $E < 0$, on peut avec profit chercher la solution sous la forme $\varphi(x) = A \cosh(Kx) + B \sinh(Kx)$,

$$\text{avec } K = \sqrt{-\frac{2Em}{\hbar^2}}.$$

Les C.A.L. conduisent à $A = 0$, puis $B \sinh(Ka) = 0 \Rightarrow B = 0$: la seule solution possible est la fonction nulle : sans intérêt !

■ Pour $E > 0$, la solution est du type $\varphi(x) = a \cos(kx) + b \sin(kx)$, avec $k = \sqrt{\frac{2Em}{\hbar^2}}$.

Les C.A.L. conduisent à $a = 0$, puis $b \sinh(ka) = 0 \Rightarrow \boxed{ka = n\pi}$, avec n entier.

La valeur $n = 0$ est exclue, car elle conduit à une fonction d'onde ψ nulle partout.

Les fonctions d'onde cherchées sont donc de la forme $\varphi(x) = b \sin\left(n \frac{\pi x}{a}\right)$.

Il est facile de les normaliser par la condition $\int_{x=0}^{x=a} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$, qui donne $b = \sqrt{2/a}$. Ainsi

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

La longueur d'onde de DE BROGLIE associée à la particule est $\lambda = \frac{na}{2}$.

On obtient la même condition que celle donnant les modes propres d'une corde vibrante de longueur a fixée à ses extrémités.

La figure 1.2 montre les trois premiers niveaux ainsi que les fonctions stationnaires associées et la densité de probabilité $|\psi_n|^2$ de la particule sur chacun de ces niveaux.

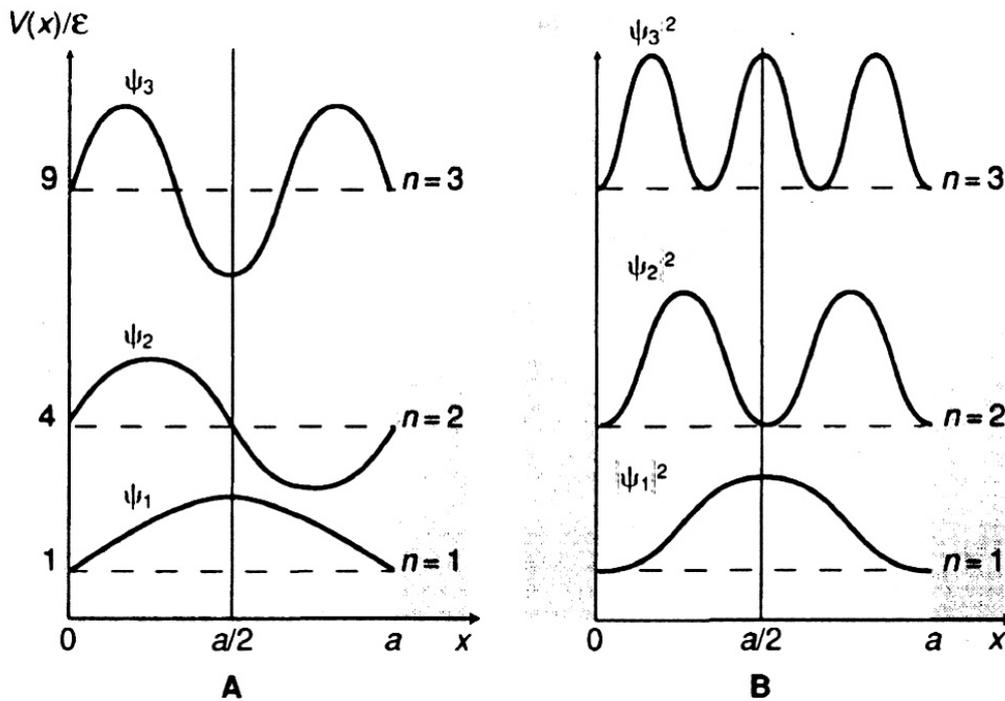


Figure 1.2: **A** : les trois premiers niveaux et les fonctions d'onde associées pour une particule dans un puits infiniment profond. L'unité d'énergie est $\varepsilon = \hbar^2/8ma^2$. **B** : les densités de probabilité associées.

1.3.3 Quantification des niveaux d'énergie.

La quantification des valeurs de k induit une quantification de l'énergie de la particule, avec pour le niveau n

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad \text{ou} \quad E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad \text{avec } n \text{ entier } \geq 1$$

Cette quantification des énergies accessibles à la particule est analogue à la quantification des pulsations propres d'une corde vibrante fixée à ses extrémités.

Cette propriété se généralise aux états liés de toute particule dans un puits de potentiel (de forme quelconque), mais la dépendance de l'énergie avec l'entier n est en général différentes (penser à l'exemple de l'oscillateur harmonique quantique à une dimension). On retient l'idée essentielle

Les niveaux d'énergie des états liés d'une particule (particule confinée) sont quantifiés.

Énergie du fondamental : énergie quantique de confinement.

L'énergie, qui se réduit ici à l'énergie cinétique de la particule, du niveau fondamental ($n = 1$) n'est pas nulle : ce n'est pas un état de repos ! Ce résultat est en accord avec les inégalités de HEISENBERG. On retient

Du fait des inégalités spatiales de HEISENBERG, le confinement d'une particule lui impose une énergie cinétique minimale non nulle, appelée énergie quantique de confinement.

En prenant $\Delta x \approx a$ et $\Delta p \approx p$, l'inégalité spatiale de HEISENBERG donne $\Delta p \geq h/a$. En considérant la particule non relativiste, on a $E = p^2/2m \geq h^2/2ma^2$.

On retrouve qualitativement l'expression de l'énergie minimale du niveau fondamental, à un facteur numérique multiplicatif près sans importance pour un raisonnement en o.d.g.

L'énergie du fondamental décroît comme la masse de la particule et le carré de la largeur de confinement.

1.4 Particule dans une boîte parallélépipédique.

On considère une particule dans une boîte aux parois infranchissables de côtés a, b, c . Les parois sont supposées parfaitement réfléchissantes et donnent lieu à des chocs parfaitement élastiques. Les composantes x, y, z de la particule ont, indépendamment les unes des autres, le même type de mouvement et il y a découplage des trois degrés de liberté.

L'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires s'écrit ici

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi(x, y, z) + k^2 \varphi(x, y, z) = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Vu le rôle symétrique joué par les trois composantes, cherchons une solution de cette équation sous la forme

$$\varphi(x, y, z) = F(x)G(y)H(z)$$

Après division par φ , on obtient

$$\frac{F''(x)}{F(x)} + \frac{G''(y)}{G(y)} + \frac{H''(z)}{H(z)} = -k^2$$

qui montre que chacun des trois termes du premier membre de cette équation doit être constant. On aboutit ainsi à

$$F''(x) + k_1^2 F(x) = 0 \quad G''(y) + k_2^2 G(y) = 0 \quad H''(z) + k_3^2 H(z) = 0 \quad \text{avec} \quad k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2$$

Pour chaque direction, on est ramené au problème précédent (§ 1.3) à une dimension avec les mêmes conditions aux limites. Ainsi

$$k_1 = \frac{n_1 \pi}{a} \quad k_2 = \frac{n_2 \pi}{b} \quad k_3 = \frac{n_3 \pi}{c} \quad \text{avec} \quad n_1, n_2, n_3 \text{ entiers } \geq 1$$

Les niveaux d'énergie et les fonctions propres associées sont définis par trois nombres quantiques. On a

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

$$\varphi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{\Omega}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right)$$

où $\Omega = abc$ est le volume de la boîte.

1.5 Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie.

1.5.1 Position du problème.

On cherche les énergies possibles d'une particule dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur V_0 , de largeur $2a$ symétrique, centré en $x = 0$ (figure 1.3). On prend pour origine des énergies la valeur du potentiel V au fond du puits : l'énergie de la particule se réduit donc à son énergie cinétique à l'intérieur du puits.

On ne s'intéresse qu'aux états liés, c'est-à-dire ceux d'énergie telle que $0 \leq E \leq V_0$. On suppose que l'énergie n'est pas suffisante pour que la particule sorte du puits.

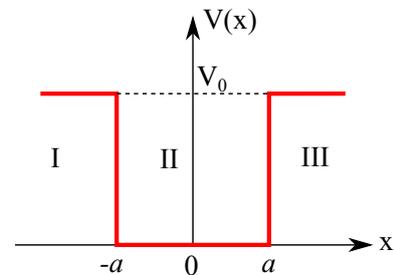


Figure 1.3: puits carré symétrique fini

Posons comme vu précédemment

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{d'où} \quad k^2 + K^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (1.2)$$

La résolution de l'équation de SCHRÖDINGER est immédiate (voir § 1.1) : les fonctions d'onde sont des exponentielles à droite et à gauche du puits (zones I et III) et des sinusoides dans le puits (zone II).

1.5.2 Forme générale des états stationnaires.

Une simplification importante provient de la symétrie du problème $V(x) = V(-x)$. Ainsi, si $\psi(x)$ est solution de l'équation de SCHRÖDINGER pour une valeur E de l'énergie, alors $\psi(-x)$ aussi et pour la même valeur E et on peut classer les solutions (normalisables) en deux catégories :

- les solutions symétriques (paires), de la forme

$$\psi_S : \quad (I) \psi(x) = Be^{Kx} \quad , \quad (II) \psi(x) = A \cos(kx) \quad , \quad (III) \psi(x) = Be^{-Kx}$$

- les solutions antisymétriques (impaires), de la forme

$$\psi_A : \quad (I) \psi(x) = -De^{Kx} \quad , \quad (II) \psi(x) = C \sin(kx) \quad , \quad (III) \psi(x) = De^{-Kx}$$

Les constantes A, B, C, D sont déterminées à partir de la continuité de ψ et ψ' en $x = \pm a$

1.5.3 Quantification de l'énergie des états liés.

Cas des états stationnaires pairs.

Les conditions de continuité imposent

$$Be^{-Ka} = A \cos(ka) \quad \text{et} \quad -KBe^{-Ka} = -kA \sin(ka)$$

qui donnent en prenant le rapport

$$K = k \tan(ka) \quad \text{ou encore} \quad Ka = ka \tan(ka)$$

La relation entre k et K (cf équation 1.2) donne par ailleurs

$$(ka)^2 + (Ka)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \quad (1.3)$$

Posons $X = ka$ et $Y = Ka$. Dans le plan (X, Y) , l'équation 1.3 est celle du cercle de centre O et de rayon $R = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}$.

Il s'agit donc de trouver les intersections de ce cercle d'équation $X^2 + Y^2 = R^2$ avec les courbes d'équation $Y = X \tan(X)$ (voir la figure 1.4).

Pour une largeur du puits $2a$ donnée, ces intersections sont en nombre fini.

Cas des états stationnaires impairs.

Les conditions de continuité imposent

$$De^{-Ka} = C \sin(ka) \quad \text{et} \quad -KDe^{-Ka} = kC \cos(ka)$$

qui donnent en prenant le rapport

$$K = -k \cot(ka) \quad \text{ou encore} \quad Ka = -ka \cot(ka)$$

On a toujours

$$(ka)^2 + (Ka)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

Posons comme précédemment $X = ka$ et $Y = Ka$. Il s'agit ici encore de trouver les intersections du cercle d'équation $X^2 + Y^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$ avec les courbes d'équation $Y = -X \cot(X)$ (voir la figure 1.5), conduisant à des valeurs permises pour k_n en nombre fini.

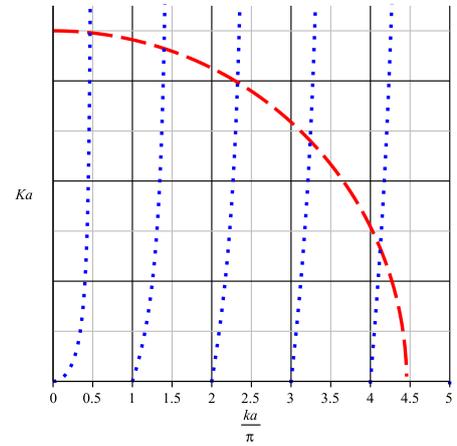


Figure 1.4: résolution graphique donnant les valeurs permises de k des états pairs.

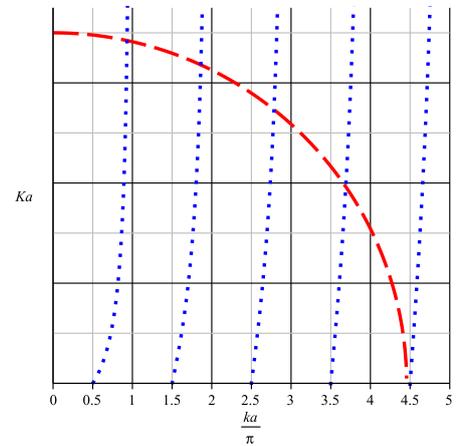


Figure 1.5: résolution graphique donnant les valeurs permises de k des états impairs.

Les valeurs possibles pour k_n sont en nombre fini et concernant alternativement des solutions paires et impaires, d'autant plus nombreuses que V_0 est grand (le nombre d'états liés croît avec la profondeur du puits). Il n'existe qu'un seul état lié si V_0 est inférieur à une valeur limite donnée par

$$\frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} < \frac{\pi}{2} \quad \text{ou} \quad V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

Les valeurs de l'énergie des états liés dans un puits de potentiel sont quantifiées $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$. La quantification est ici une conséquence, non pas des conditions de raccordement, mais de la normalisabilité des fonctions d'onde (par l'élimination des termes exponentiellement croissants à l'infini).

On peut classer les solutions par valeurs croissantes de l'énergie E , suivant le nombre de nœuds de la fonction d'onde. L'état de plus basse énergie est appelé état fondamental.

À noter une différence essentielle avec la mécanique classique :

La particule a une probabilité de présence *non nulle* dans les régions classiquement *interdites* (régions pour lesquelles l'énergie cinétique serait négative, donc *énergétiquement illégale*) : elle ne s'y propage pas (elle peut pénétrer mais "rebondit"). La fonction d'onde décroît exponentiellement avec une profondeur de pénétration $1/K$ (analogue à l'*effet de peau* en électromagnétisme). On voit apparaître la "*limite classique*" : $1/K \rightarrow 0$, si on fait tendre $\hbar \rightarrow 0$ ou si $m \rightarrow \infty$.

États dits de diffusion (non liés) dans un puits de profondeur finie.

Dans le cas où $E > V_0$, les solutions stationnaires de l'équation de SCHRÖDINGER sont des fonctions bornées (sinusoïdes) et toutes les valeurs de $E > V_0$ sont permises. Il n'y a plus de quantification de l'énergie pour de tels états de diffusion. Ce résultat se généralise à toute forme de puits

Les énergies des *états de diffusion* (non liés) d'une particule dans un puits fini de potentiel de forme quelconque, peuvent prendre *toutes les valeurs continues possibles* avec $E > V_0$, où V_0 est la profondeur du puits.

2 Les états non liés. Effet tunnel.

2.1 Description de l'effet tunnel.

Soit la barrière de potentiel représentée sur la figure 2.1.

On suppose pour simplifier que $V(\pm\infty) = 0$. On peut décomposer l'espace en 3 régions :

- dans les régions I et III, on a $V \simeq 0$
- dans la région II, on a $V \neq 0$.

Une source de particules S située à $-\infty$ les envoie vers la droite avec l'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Classiquement, si $E < V_{max}$, toutes les particules ont leur vitesse qui s'annule au contact de la barrière, elles sont toutes réfléchies et repartent vers la source avec la même vitesse absolue.

Si $E > V_{max}$, les particules incidentes sont ralenties par la barrière, puis accélérées, et partent dans la région III avec la vitesse incidente : elles sont toutes transmises.

En mécanique quantique, la situation est différente. Dans les régions I et III, l'équation de SCHRÖDINGER s'écrit

$$\psi'' + k^2\psi = 0$$

et admet les solutions

$$\psi_I = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} \quad \text{et} \quad \psi_{III} = A_{III} e^{ikx} + B_{III} e^{-ikx}$$

Quelle que soit la valeur de E , on trouve des solutions bornées à l'infini : il n'y a pas de quantification de l'énergie. Les termes e^{ikx} et e^{-ikx} représentent des particules se dirigeant vers la droite (respectivement vers la gauche) avec des impulsions $\hbar k \vec{e}_x$ et $-\hbar k \vec{e}_x$.

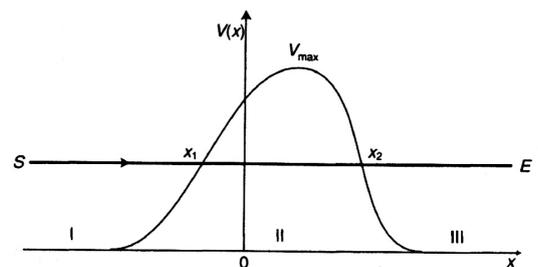


Figure 2.1: particules d'énergie E arrivant sur une barrière de potentiel

Conformément au troisième postulat, le nombre de ces particules par unité de longueur est proportionnel au module carré des coefficients $A_I, B_I, A_{III}, B_{III}$.

Mais, physiquement, dans la région III, il ne peut pas y avoir de particules venant de la droite puisqu'il n'y a pas de sources à $+\infty$: donc $B_{III} = 0$.

Les constantes A_{III} et B_{III} étant fixées, A_I et B_I sont complètement déterminés en effectuant le raccord des solutions d'une région à l'autre. Bien sûr A_I et B_I dépendent de la valeur de E : ***l'expression de ψ_I montre qu'une particule issue de la source peut soit franchir la barrière et devenir une particule transmise, soit retourner vers la gauche et devenir une particule réfléchie.***

Probabilités de réflexion et de transmission.

En posant $\omega = E/\hbar$, on peut écrire

fonctions d'onde	vecteurs densité de courant de probabilité
onde incidente : $\psi_i(x, t) = A_I \exp [i(kx - \omega t)]$	onde incidente : $\vec{j}_i = A_I ^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$
onde réfléchie : $\psi_r(x, t) = B_I \exp [-i(kx + \omega t)]$	onde réfléchie : $\vec{j}_r = B_I ^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$
onde transmise : $\psi_t(x, t) = A_{III} \exp [i(kx - \omega t)]$	onde transmise : $\vec{j}_t = A_{III} ^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$

On définit les coefficients R de réflexion et T de transmission donnant les probabilités respectives qu'a la particule de se réfléchir sur la barrière ou de la franchir.

$$R = \frac{\|\vec{j}_r\|}{\|\vec{j}_i\|} = \frac{|B_I|^2}{|A_I|^2} \quad \text{et} \quad T = \frac{\|\vec{j}_t\|}{\|\vec{j}_i\|} = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2}$$

On peut toujours imposer $|A_{III}| = 1$ sans restreindre la généralité du problème qui donne

$$R = \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2 \quad \text{et} \quad T = \frac{1}{|A_I|^2}$$

La conservation de la probabilité de présence impose $R + T = 1$.

Concrètement, dans la plupart des cas physiques, si $E < V_{max}$, on a $T \ll 1$, mais $T \neq 0$: c'est ***l'effet tunnel*** qui joue un rôle fondamental en physique des semi-conducteurs ou en radioactivité. La particule peut franchir la barrière et traverser une région d'énergie cinétique négative ! C'est un des aspects les plus spectaculaires de la mécanique quantique. On désigne souvent T comme la ***transparence de la barrière***. L'effet tunnel est caractérisé par l'existence d'***ondes évanescentes*** dans la barrière de potentiel.

2.2 Transparence d'une barrière de potentiel rectangulaire.

Cette barrière, représentée sur la figure 2.2, est définie par

$$V(x) = V_0 \text{ pour } 0 < x < a \quad ; \quad V(x) = 0 \text{ pour } x < 0 \text{ ou } x > a$$

Un tel profil se prête à un calcul exact de la transparence T . On suppose $E < V_0$.

Dans la région III, on écrit, pour une simplification des calculs

$$\psi_{III} = e^{ik(x-a)}$$

ce qui revient à choisir $A_{III} = e^{-ika}$ avec toujours $|A_{III}| = 1$.

Dans la région II où l'équation de SCHRÖDINGER s'écrit

$$\psi'' - \alpha^2 \psi = 0 \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

On a la solution $\psi_{II} = A_{II}e^{\alpha x} + B_{II}e^{-\alpha x}$

Les conditions de continuité de ψ et ψ' sur les discontinuités du potentiel en $x = 0$ et $x = a$ fournissent les relations

$$A_I + B_I = A_{II} + B_{II} \quad ik(A_I - B_I) = \alpha(A_{II} - B_{II})$$

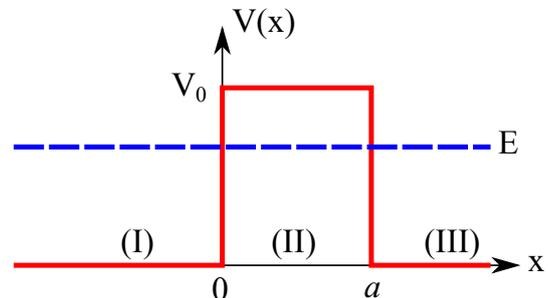


Figure 2.2: barrière de potentiel rectangulaire

$$A_{II}e^{\alpha a} + B_{II}e^{-\alpha a} = 1 \quad \alpha(A_{II}e^{\alpha a} - B_{II}e^{-\alpha a}) = ik$$

Ce qui donne, en éliminant B_I, A_{II} et B_{II}

$$4A_I = e^{-\alpha a} \left(1 + i\frac{k}{\alpha}\right) \left(1 + \frac{\alpha}{ik}\right) + e^{\alpha a} \left(1 - i\frac{k}{\alpha}\right) \left(1 - \frac{\alpha}{ik}\right)$$

$$4A_I = 4 \cosh(\alpha a) - 2i \left(\frac{k}{\alpha} - \frac{\alpha}{k}\right) \sinh(\alpha a)$$

On en déduit

$$\frac{1}{T} = |A_I|^2 = 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 \sinh^2(\alpha a)$$

Soit encore, compte tenu de la valeur de α

$$\boxed{\frac{1}{T} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\alpha a)} \quad (2.1)$$

Discussion.

- Pour $E = 0$, on a $T = 0$: logique, puisque dans ce cas la particule est immobile.
- Le préfacteur $\frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2}$ est maximal pour $E = V_0/2$ et vaut alors 1. Pour $\alpha a \gg 1$, on a

$$\sinh^2(\alpha a) \sim \frac{1}{4} \exp(2\alpha a) \quad \text{et on obtient} \quad T \sim 4 \exp(-2\alpha a)$$

Dans le cas d'une **barrière épaisse**, $\alpha a \gg 1$ et $\sinh(\alpha a) \simeq \exp(\alpha a/2)$. le second terme de l'équation 2.1 est largement prépondérant. En autorisant un facteur d'erreur de l'ordre de quelques unités (au maximum 4), on a

$$\boxed{T \simeq e^{-2\alpha a}} \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Le facteur de transmission par effet tunnel décroît exponentiellement avec la masse, la hauteur V_0 de la barrière et son épaisseur a .

Franchissement de barrières de potentiel.

- Pour un électron avec des o.d.g. atomiques : $E = 1 \text{ eV}$, $V_0 = 2 \text{ eV}$, $a \sim 0,1 \text{ nm}$, on obtient $T \simeq 0,8$ ce qui représente une **probabilité de passage de 80 %** : voilà bien un résultat parfaitement anticlassique !
- Dans les mêmes conditions, un proton $m_p \sim 2000m_e$ a une **probabilité de passage** $p \approx 10^{-19}$ à cause de l'effet de masse. Autrement dit, qu'on proton ou un noyau occupent un site bien déterminé dans un atome ou une molécule a un sens !
- À des échelles nucléaires, en prenant $V_0 = 2E \sim 10 \text{ MeV}$ et $a \sim 1 \text{ fm}$, la probabilité est de 80 % et **le proton est délocalisé dans le noyau.**

2.3 Application à la radioactivité α .

L'exemple le plus célèbre d'effet tunnel pouvant être traité de cette manière est celui de l'émission de particules α par des noyaux lourds radioactifs dont l'explication a été donnée par le physicien russe GEORGES GAMOV en 1928. La particule α est un noyau d'hélium constitué de deux protons et deux neutrons, dont la masse M est environ 7000 fois de l'électron, sa charge étant $2e$.

Ces particules sont émises avec une énergie E de 4 à 9 MeV. La longueur d'onde de DE BROGLIE associée, $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2ME}}$ est de l'ordre de $7 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, c'est-à-dire de l'o.d.g. du rayon R du noyau : la particule se déplace donc à l'intérieur du noyau lourd. Elle est maintenue à l'intérieur de ce noyau par des forces nucléaires attractives beaucoup plus fortes que la répulsion coulombienne provoquée par les autres protons du noyau.

L'émission d'une particule α se traduit par la réaction nucléaire



Une fois que la particule a quitté le noyau, son énergie potentielle est simplement le terme de Coulomb

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r} \quad (r > R)$$

La figure 2.3 représente schématiquement le potentiel $V(r)$ auquel est soumis la particule α .

Si, dans le puits de potentiel nucléaire, la particule α a une énergie $E' < 0$, elle ne pourra pas quitter le noyau spontanément et celui-ci restera stable.

À l'inverse, si $E > 0$, elle peut franchir la barrière de potentiel entre A et B et le noyau est radioactif.

La rayon r_1 correspondant au point B est donné par

$$r_1 = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 E}$$

La barrière n'étant pas rectangulaire, le calcul de sa transparence par effet tunnel n'est pas immédiat et un calcul approché permet de montrer que

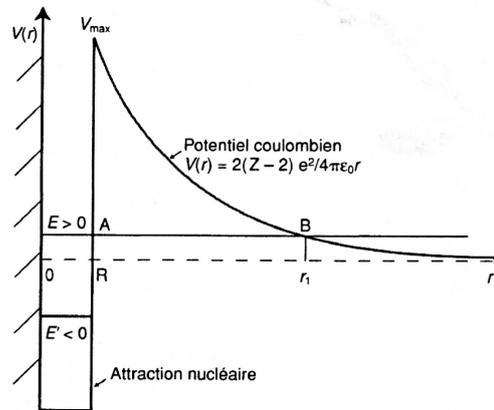


Figure 2.3: énergie potentielle d'une particule α au voisinage d'un noyau (rayon R)

$$T \simeq \exp \left[-\gamma \left(\pi - 4\sqrt{R/r_1} \right) \right] \quad \text{avec} \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2M2(Z-2)e^2r_1}{4\pi\epsilon_0}}$$

Typiquement, pour le noyau d'uranium ^{238}U , on trouve $\gamma \simeq 55$, $\sqrt{R/r_1} \simeq 0,387$ et

$$T \simeq e^{-89} \simeq 2.10^{-39}$$

Par ailleurs, la particule α a dans le puits une vitesse de l'ordre de 10^7 m.s^{-1} et elle effectue des allers-retours dans un noyau dont le rayon est de l'ordre de 10^{-14} m . Elle effectue donc environ 10^{21} oscillations par seconde où chaque fois elle a une probabilité T de franchir la barrière de potentiel. Cette probabilité par unité de temps est ainsi déterminée par $\lambda = 10^{21}T \simeq 2.10^{-18} \text{ s}^{-1}$.

λ représente la "**constante radioactive**" de l'élément, qui intervient dans la loi de désintégration radioactive, où l'**activité** A de la substance, définie comme le nombre de noyaux détruits par unité de temps, est donnée par

$$A(t) = -\frac{dN}{dt} = \lambda N(t) \quad \text{qui donne} \quad N(t) = N_0 \exp(-\lambda t)$$

On définit aussi la **période radioactive** $T_{1/2}$ de l'élément (encore appelée **demi-vie**), comme la durée pour laquelle la moitié des noyaux initialement présents s'est désintégrée, vérifiant

$$N(\tau_{1/2}) = N_0/2 \quad \Rightarrow \quad T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

Expérimentalement, on a mesuré pour ^{238}U $\lambda = 5.10^{-18} \text{ s}^{-1}$.

Le modèle présenté donne donc des résultats très satisfaisants.

Les observations montrent que **la période radioactive est une fonction décroissante de l'énergie E de la particule α émise**, avec une dynamique très importante puisque

■ $T_{1/2} = 7,2.10^{14} \text{ s} \simeq 23.10^6 \text{ ans}$ pour l'uranium 238 où $E_\alpha = 4 \text{ MeV}$

■ $T_{1/2} = 3.10^{-7} \text{ s}$ pour le polonium 212 où $E_\alpha = 9 \text{ MeV}$

2.4 Microscopie à effet tunnel, nanotechnologies.

Une application importante de l'effet tunnel a été la mise au point dans les années 1980 par BINNING et ROHRER, du microscope à effet tunnel (Nobel 1986) (figure 2.4).

On déplace une pointe fine au voisinage de la surface d'un cristal à l'aide de transducteurs piézoélectriques (fig. (a)).

Une boucle d'asservissement ajuste la distance de la pointe à la surface du cristal à distance très petite $\Delta \simeq 1 \text{ nm}$ de façon que le courant provenant du passage d'électrons par effet tunnel soit constant (ce courant est extrêmement sensible à la distance, en fait au potentiel électrique V_0).

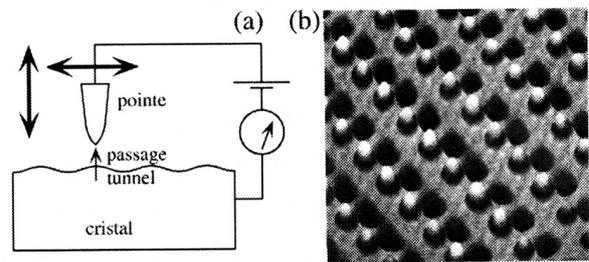


Figure 2.4: principe d'un microscope à effet tunnel

Le signal d'erreur de la boucle d'asservissement produit une cartographie directe de la distribution de densité électronique à la surface du cristal. On détecte ainsi des détails incroyablement fins $\simeq 0,01 \text{ nm}$.

Un exemple est montré en (b) où l'on voit une surface de l'antimoniure d'indium (InSb). Les atomes d'antimoine apparaissent en relief. La taille réelle de l'échantillon représenté est $\sim 3 \text{ nm}$.

L'effet tunnel a permis des avancées spectaculaires dans le domaine des nanotechnologies, permettant des capacités d'intervention à l'échelle du nanomètre, c'est-à-dire comparables à l'activité d'un virus.

Le 29 septembre 1989, D EIGLER, chercheur à IBM, a pu manipuler des atomes individuels sur un support métallique, en les prélevant avec une pointe et en les redéposant sur un autre site du support. EIGLER a d'abord réussi à écrire le sigle IBM avec 35 atomes de xénon sur un substrat de nickel (figure 2.5).

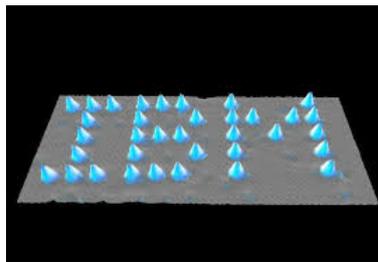


Figure 2.5: construction du sigle "IBM" avec 35 atomes de xénon sur un substrat de nickel.

3 Un exemple de double puits symétrique : la molécule d'ammoniac.

3.1 Le modèle.

Considérons maintenant un double puits de potentiel symétrique, constitué de deux puits de largeur a , centrés en $\pm b$, séparés par une barrière de hauteur V_0 et de largeur $\Delta = 2b - a$.

Une telle situation modélise par exemple la molécule d'ammoniac NH_3 (figure 3.1). Dans ces états de plus basse énergie, cette molécule a une forme pyramidale avec un atome d'azote au sommet et trois atomes d'hydrogène à la base formant un triangle équilatéral. C'est un objet très complexe de 14 particules (4 noyaux, 10 électrons), permettant de nombreux mouvements possibles d'un tel édifice. Mais les mouvements de plus basse énergie correspondent au déplacement du plan des 3 atomes d'hydrogène, que l'on appellera collectivement une "particule de masse m ", par rapport à l'atome d'azote le long de l'axe de symétrie de la molécule.

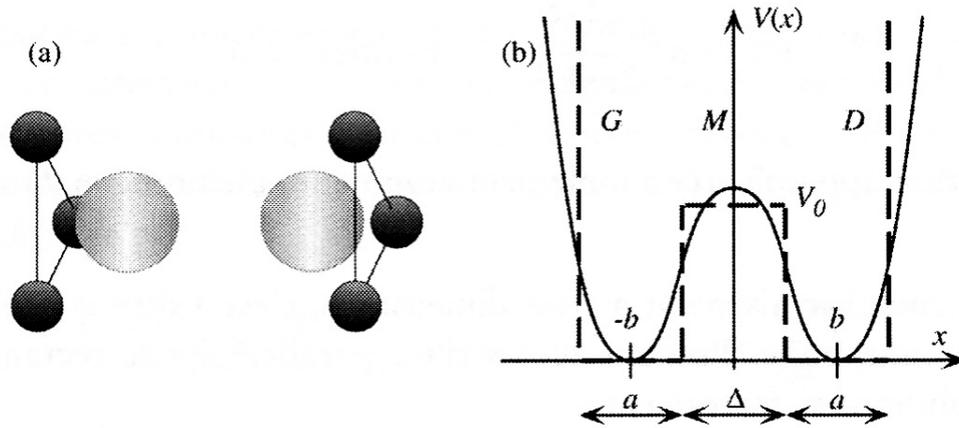


Figure 3.1: la molécule d'ammoniac : (a) les deux configurations classiques. (b) potentiel réel (traits pleins) et potentiel simplifié (pointillés) décrivant le retournement de la molécule.

Lorsque l'abscisse x de ce plan varie le long de $x > 0$, l'énergie potentielle a un minimum correspondant à une configuration d'équilibre classique. Mais la molécule peut se retourner comme un parapluie et il existe une autre configuration stable symétrique pour x négatif. L'énergie potentielle est symétrique, à deux minima, avec un maximum au milieu : la configuration où les 4 atomes sont coplanaires est instable.

Ces deux configurations d'équilibre ne sont pas physiquement équivalentes, car la molécule possède un moment cinétique intrinsèque: on peut donc définir la droite et la gauche, comme pour un parapluie.

On peut résoudre ce problème numériquement, mais on peut aussi le modéliser par le potentiel rectangulaire $V(x)$ en pointillés sur la figure 3.1.

On se pose la question suivante : pour $E > V_0$, il y a des oscillations périodiques de la gauche vers la droite. Mais lorsque $E < V_0$, pour une valeur donnée de l'énergie E , il y a toujours deux configurations classiques possibles de même énergie, donc deux positions d'équilibre classique : l'une dans le puits de gauche, l'autre dans le puits de droite.

Que se passe-t-il quantiquement ?

3.2 Les états stationnaires. Effet tunnel.

On considère, comme déjà vu au § 2., les états d'énergie d'une "particule de masse m " tels que classiquement, la particule ne peut pas franchir la barrière : $E < V_0$.

On définit comme précédemment

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Le problème a la symétrie ($x \leftrightarrow -x$). On peut donc classer les solutions suivant leur parité ou imparité.

Les solutions sont sinusoïdales dans les régions G et D et exponentielles dans la région centrale M. Les fonctions d'onde doivent s'annuler pour $x = \pm(b + a/2)$ et les fonctions d'onde associées à la particule s'écrivent

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \pm A \sin \left[k \left(b + \frac{a}{2} + x \right) \right] && \text{région G} \\ \psi(x) &= \begin{cases} B \cosh(Kx) & \text{solution symétrique} \\ B \sinh(Kx) & \text{solution antisymétrique} \end{cases} && \text{région M} \\ \psi(x) &= A \sin \left[k \left(b + \frac{a}{2} - x \right) \right] && \text{région D} \end{aligned}$$

Les solutions de plus basse énergie, l'une symétrique, l'autre antisymétrique, sont représentées sur la figure 3.2.

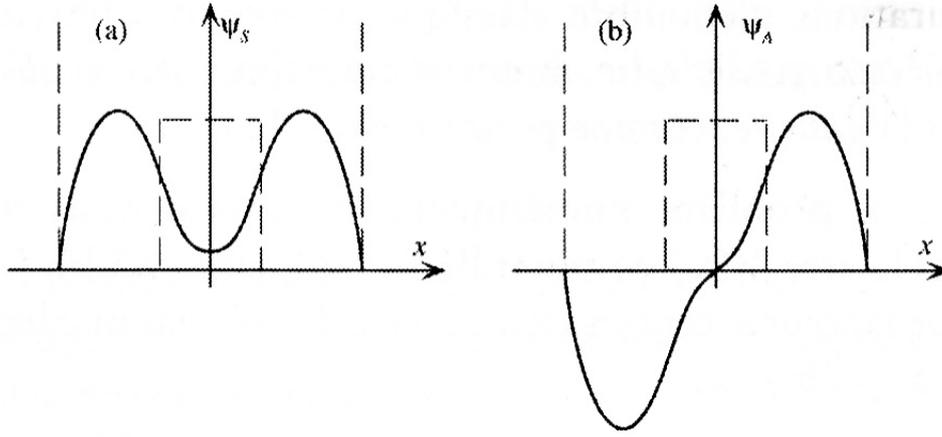


Figure 3.2: solution symétrique (a) et antisymétrique (b) de plus basse énergie dans le double puits rectangulaire

On remarque que la fonction d'onde existe dans la région classiquement illégale $E < V_0$: c'est la réflexion de l'exponentielle du puits simple mais tronquée à une distance finie. Cet effet a pour conséquence de symétriser (ou d'antisymétriser) la fonction d'onde. Par conséquent, dans tous les états stationnaires, la particule a la même probabilité d'être à droite ou à gauche.

Il s'agit donc d'un problème à deux puits, mais, puisque la particule a une probabilité de présence non nulle dans la région énergétiquement illégale, ces deux puits sont "couplés" par effet tunnel.

3.3 Les niveaux d'énergie.

La continuité de ψ et ψ' en $x = \pm(b - a/2)$ donne les conditions

$$\begin{aligned} \tan(ka) &= -\frac{k}{K} \coth [K(b - a/2)] && \text{pour une solution symétrique} \\ \tan(ka) &= -\frac{k}{K} \tanh [K(b - a/2)] && \text{pour une solution antisymétrique} \end{aligned}$$

Qu'on combine avec la condition $k^2 + K^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ pour trouver (numériquement) les solutions en k .

Pour mieux comprendre la physique du problème, supposons (ce qui est le cas pour NH_3) :

$$V_0 \gg E, \text{ d'où } K \simeq \sqrt{2mV_0/\hbar^2} = \text{cste} \text{ et } K\Delta \gg 1$$

Le système précédent se simplifie en

$$\begin{aligned} \tan(ka) &\simeq -\frac{k}{K} [1 + 2e^{-K\Delta}] && \text{pour une solution symétrique} \\ \tan(ka) &= -\frac{k}{K} [1 - 2e^{-K\Delta}] && \text{pour une solution antisymétrique} \end{aligned}$$

Ces équations permettent de déterminer les valeurs quantifiées de ka . Ces valeurs apparaissent sur la construction graphique de la figure 3.3, comme les abscisses des intersections des branches successives de $y = \tan(ka)$ avec deux droites $y = -\varepsilon_A ka$ et $y = -\varepsilon_S ka$, où les deux constantes sont

$$\varepsilon_A = \frac{1}{Ka} (1 - 2e^{-K\Delta}) \quad \varepsilon_S = \frac{1}{Ka} (1 + 2e^{-K\Delta})$$

Ces intersections sont situées au voisinage de $ka \sim \pi$.

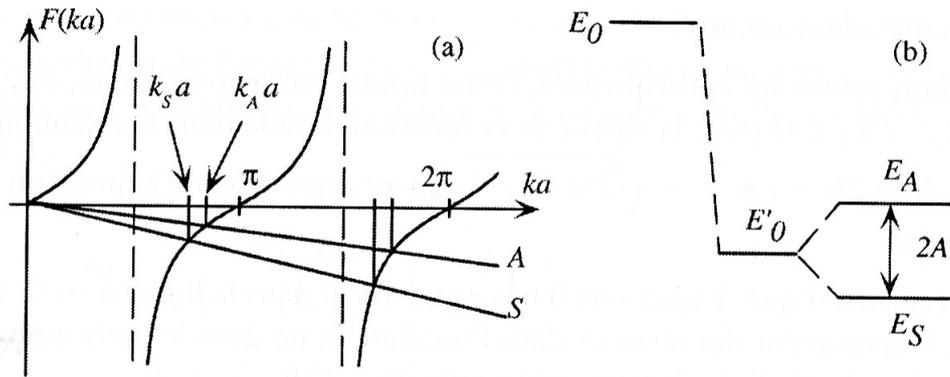


Figure 3.3: (a) Construction graphique des niveaux d'énergie dans le double puits rectangulaire. (b) les deux premiers niveaux sont abaissés par rapport à l'énergie du fondamental d'un puits simple.

Pour $K \rightarrow \infty$, $V_0 \rightarrow \infty$, on retrouve bien deux puits infinis indépendants et la particule est dans l'un ou l'autre. Les énergies sont $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$; l'o.d.g. des énergies E_S et E_A est $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

Pour K fini (et donc V_0 fini), par l'effet du couplage, on observe un abaissement vers E'_0 compréhensible intuitivement. Les deux puits communiquent par effet tunnel et la particule "voit" un puits effectif plus large que a . Cet abaissement est accompagné d'un *clivage* en deux *sous-niveaux*, comme indiqué en (b) sur la figure 3.3. **L'état symétrique est le plus lié.**

Dans l'approximation envisagée ($K \gg k$, $Ka \gg 1$), on obtient

$$k_S \sim \frac{\pi}{a(1 + \varepsilon_S)} \quad k_A \sim \frac{\pi}{a(1 + \varepsilon_A)}$$

avec ε_S et $\varepsilon_A \ll 1$. On obtient ainsi une énergie moyenne $E'_0 = \frac{E_A + E_S}{2} \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{Ka}\right)$.

Le clivage $E_A - E_S$ des deux niveaux par effet tunnel est

$$E_A - E_S = 2A \simeq \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \left[\frac{1}{(1 + \varepsilon_A)^2} - \frac{1}{(1 + \varepsilon_S)^2} \right] \simeq \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \frac{8e^{-K\Delta}}{Ka}$$

D'où

$$A \simeq \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \frac{4}{Ka} e^{-K\Delta}$$

Puisque $K \simeq \sqrt{2mV_0}/\hbar$ dans cette approximation, le clivage décroît exponentiellement vers zéro quand Δ ou $V_0 \nearrow$.

Dans toutes ses conséquences, l'effet tunnel est proportionnel, tant pour le clivage $E_A - E_S$ que pour la valeur de la fonction d'onde dans la région illégale, à $e^{-K\Delta}$ où $\Delta = 2b - a$ et $K \simeq \sqrt{2mV_0}/\hbar$.
On note également que $A \rightarrow 0$ très rapidement dans la limite $\hbar \rightarrow 0$.

On voit là une différence fondamentale avec le cas classique : il y a bien deux états de plus basse énergie, mais classiquement, ils ont la même énergie (E_0), **alors qu'en physique quantique ils sont clivés**. Ce résultat qualitatif est *général* pour un puits double de forme quelconque.

3.4 Fonctions d'onde ; évolution temporelle; interférences quantiques.

3.4.1 Superposition linéaire d'états.

Les fonctions d'onde correspondant aux deux niveaux E_S et E_A (représentées en 3.2) sont telles que la probabilité de trouver la particule à gauche ou à droite est la même : de fait, la particule est à gauche *et* à droite ! Ce résultat est véritablement contraire au résultat classique, mais cette différence n'est pour le moment pas vérifiable à cause de l'interprétation statistique : si on fixe comme seule condition que l'énergie soit minimale, il est normal d'en trouver la moitié de chaque côté.

Le problème qui se pose est le suivant : comment mettre quantiquement la particule à *droite* ou à *gauche* ? Il faut la préparer de façon que sa fonction d'onde soit concentrée à droite ou à gauche : c'est faisable en utilisant le principe de superposition. Considérons ainsi les fonctions d'onde

$$\psi_G = \frac{\psi_S - \psi_A}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad \psi_D = \frac{\psi_S + \psi_A}{\sqrt{2}}$$

Ces fonctions décrivent des états où pratiquement toute la probabilité de présence est concentrée à gauche (pour ψ_G) ou à droite (pour ψ_D) : voir la figure 3.4

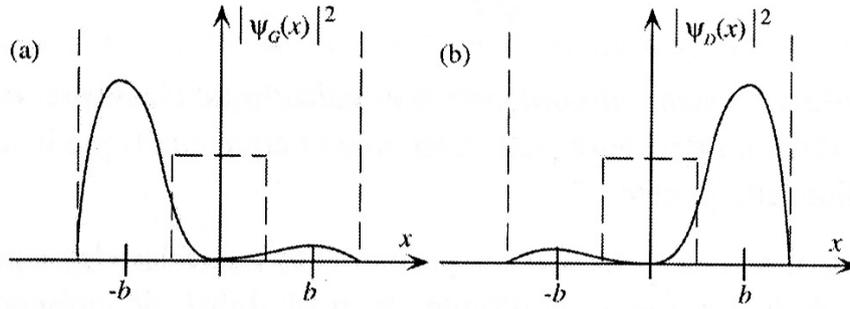


Figure 3.4: configurations classiques de la molécule d'ammoniac

On obtient ainsi le résultat suivant :

- ψ_D est une superposition linéaire des états d'énergie bien définie qui interfèrent constructivement à droite et destructivement à gauche,
- ψ_G est une superposition linéaire des états d'énergie bien définie qui interfèrent constructivement à gauche et destructivement à droite.

On peut inverser ces relations et dire, de même, que les états d'énergie bien définie, qui sont à la fois à gauche et à droite, sont des superpositions linéaires en interférence d'états classiques s'excluant l'un l'autre.

3.4.2 Évolution temporelle.

L'état ψ_D n'est pas un état stationnaire car le système n'a pas une énergie bien définie : $p(E_S) = p(E_A) = \frac{1}{2}$. Son évolution dans le temps s'écrit

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_S(x) e^{-iE_S t/\hbar} + \psi_A(x) e^{-iE_A t/\hbar} \right]$$

ce qu'on peut encore écrire, en introduisant la pulsation ω du système telle que $\hbar\omega = E_A - E_S = 2A$

$$\psi(x, t) = \frac{e^{-iE_S t/\hbar}}{\sqrt{2}} \left[\psi_S(x) + \psi_A(x) e^{-i\omega t} \right]$$

Nous remarquons qu'à l'instant $t_1 = \pi/\omega$, on a $\psi(x, t_1) = \frac{e^{-iE_S t_1/\hbar}}{\sqrt{2}} [\psi_S(x) - \psi_A(x)]$, montrant que la particule est à gauche ! (à un terme de phase près, $\psi(x, t_1)$ est ψ_G).

Quantiquement, il y a une oscillation périodique entre les deux puits par effet tunnel à la pulsation $\omega = \frac{2A}{\hbar}$. C'est un effet totalement non classique. Dans le cas spécifique de la molécule d'ammoniac, on l'appelle "*l'inversion de la molécule d'ammoniac*" qui se retourne périodiquement comme un parapluie à la pulsation ω .

La fréquence d'inversion se mesure avec précision. Dans l'état le plus bas, le clivage est $2A \simeq 10^{-4} \text{ eV}$ d'où $\nu \simeq 24 \text{ GHz}$ (ou $\lambda \simeq 1,25 \text{ cm}$). NH_3 possède un moment dipolaire permanent qui s'inverse quand la molécule se retourne : il en résulte l'absorption ou l'émission d'une onde hertzienne à cette fréquence : c'est une raie caractéristique de l'ammoniac, utilisée en radioastronomie pour détecter NH_3 dans le milieu interstellaire.

Signalons pour finir qu'il était impossible de prévoir l'ordre de grandeur de cette fréquence qualitativement par analyse dimensionnelle, avant de comprendre le mécanisme de l'effet tunnel et de trouver l'exponentielle

$$A \simeq \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \frac{4}{Ka} e^{-K\Delta} .$$